

# Моделирование изображений получаемых с помощью растрового электронного микроскопа методом Монте-Карло

А.С. Шабека<sup>а</sup>, В.В. Подлипов<sup>а,б</sup>, А.В. Куприянов<sup>а,б</sup>

<sup>а</sup> Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, 443086, Московское шоссе, 34, Самара, Россия

<sup>б</sup> Институт систем обработки изображений РАН - филиала ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, 443001, ул. Молодогвардейская, 151, Самара, Россия

## Аннотация

В данной работе был рассмотрен метод Монте-Карло для формирования изображений микрорельефа, получаемых в растровом электронном микроскопе. Изучено распространение пучка электронов в веществе. Также были проведены экспериментальные расчеты для двух типов рельефа. В результате работы были получены изображения рельефа образца.

**Ключевые слова:** пучок электронов; растровый электронный микроскоп; метод Монте-Карло; электронная микроскопия; микрорельеф; математическое моделирование

## 1. Введение

Растровый электронный микроскоп (РЭМ) является незаменимым средством для измерения и анализа в задачах нанометрологии, материаловедения, детектирования, исследования наночастиц, в целях электронно-лучевой литографии. В основе работы РЭМ лежит сканирование остросфокусированным электронным пучком по поверхности, который, взаимодействует с атомной структурой объекта исследования, выбивая из приповерхностных слоев вторичные электроны, обратнорассеянные, характеристическое тормозное рентгеновское излучение, фононы, плазмоны и др. путем многократных упругих и неупругих взаимодействий внутри вещества, позволяет детектировать сигналы образующиеся в результате таких взаимодействий. Использование различных видов и конструкций детекторов позволяет выделять топологический или фазовый контраст, комбинировать, получать дополнительную информацию об атомном составе в заданной области сканирования. Однако, часто, изображение одного и того же объекта, полученное на различных РЭМ, может иметь очень существенные отличия, вызванные особенностями конструкции, системы формирования пучка, особенностями камеры и расположения детекторов, образца, источника электронов, системы преобразования физических сигналов в электрические, и далее в цифровое изображение. Для учета всех перечисленных особенностей и оценки влияния на получаемое изображение различных факторов, и уменьшения их влияния на метрологические характеристики, в последнее время активно проводятся исследования и моделирование работы РЭМ классическим методом Монте-Карло и, для увеличения быстродействия расчетов, его аналогами. В настоящее время известны работы, моделирующие изображение рельефа поверхности однородных материалов [1]; учитывающие эффекты влияния на формирование сигналов поверхностной зарядки исследуемой поверхности [2]; учитывающие особенности конструкции и расположение детекторов [3]; учитывающие особенности наношероховатости, кристаллографической ориентации [4]. Однако все перечисленные работы не имеют возможности в полной мере решать задачи 3d реконструкции микрорельефа, что ограничивает сферу применения РЭМ. В большинстве случаев на практике для получения сведений о высоте микрорельефа изображения полученные в РЭМ необходимо дополнять сведениями полученный другими аналитическими методами, такими как СЗМ, интерферометрия, оптическая микроскопия, корреляционная микроскопия [5]. Проведение дополнительных исследований несет дополнительные затраты на проведения измерения, а часто отыскать требуемые области микронных размеров и измерить другими методами либо невозможно либо чрезвычайно затруднительно. В связи с чем в данной работе авторы проводят исследования возможности 3d реконструкции микрорельефа путем получения изображений с помощью РЭМ и их математической обработки.

## 2. Теоретический анализ

Применение метода Монте-Карло для моделирования распространения электронов предполагает, что электрон с начальной энергией падает на поверхность образца в некоторую точку и, испытывая соударения, может отразиться из образца или остаться в нем.

Задача переноса электронов в веществе ставится исходя из следующих предположений:

- электроны и ядра атомов мишени расположены случайно относительно налетающей частицы, хотя и не обязательно с постоянной плотностью;
- электрон может взаимодействовать только с одним рассеивающим центром;
- сами электроны не взаимодействуют между собой, что вполне реально при низких значениях плотности тока;

Из этих предположений можно прийти к интерпретации взаимодействия и прийти к понятию траектории частицы как некоторой ломаной, в точках излома которой происходит взаимодействие электронов с веществом и изменение направления её движения и энергии. Взаимодействие электронов с веществом характеризуется упругим рассеянием и столкновениями, сопровождающимися потерями энергии, обусловленными двумя основными механизмами: радиационным и ионизационным торможением. При потере энергии до уровня ионизации электрон перестает перемещаться в образце.

Отдельная траектория, хотя она и может быть точно рассчитана, не дает полной картины взаимодействия электрона с твердым телом, и поэтому для достижения статистической достоверности необходимо рассчитать большое число траекторий (1000-10000). При использовании большого количества траекторий (более 10 000) и правильном выборе алгоритма расчетов методом Монте–Карло основные характеристики взаимодействия определяются с точностью до 1-5%.

Упругое рассеяние происходит при столкновении электронов с ядрами атомов, частично экранированных связными электронами. Электрон отклоняется от направления падения на угол  $\varphi_y$ , который, как правило, принимает значения на отрезке  $[2^\circ, 10^\circ]$ .

Расстояние, которое электрон проходит между двумя соседними взаимодействиями, равно длине пробега электрона:

$$s = -\lambda \ln(1 - \xi), \quad (1)$$

где  $\xi \in [0,1]$ ,  $\lambda$  - средняя длина пробега электрона. Средний пробег электрона:

$$\lambda = \frac{A}{N_0 \rho \sigma}, \quad (2)$$

где  $A$  – атомный вес, г/моль;  $N_0$  – число Авогадро  $\rho$  – плотность,  $\text{г/см}^3$ ;  $\sigma$  – сечение рассеяния.

В качестве сечения можно использовать сечение по модели Резерфорда:

$$\sigma(>\varphi_0) = 1,62 \cdot 10^{-20} \cdot \left( \frac{Z}{E} \operatorname{ctg} \left( \frac{\varphi_0}{2} \right) \right)^2. \quad (3)$$

Рассеяние происходит путем множественных дискретных процессов, но во многих случаях полезно рассматривать все неупругие процессы, создающие непрерывные потери энергии, сгруппированными вместе. Соотношение для непрерывной потери энергии, учитывающее все потери на единицу длины в твердом теле дается уравнением Бете:

$$\frac{dE}{dS} = -7,85 \cdot 10^4 \frac{Z\rho}{AE_m} \ln \left( \frac{1,166E_m}{J} \right), \quad (4)$$

где  $Z$  - атомный номер,  $A$  - атомный вес [г/моль],  $\rho$  - плотность материала мишени [ $\text{г/см}^3$ ],  $E_m$  - средняя энергия электрона на пути  $dS$  [кэВ],  $J$  - средний потенциал ионизации [кэВ] и равен:

$$J = (9.76Z + 58.5Z^{-0.19}) 10^{-3}. \quad (5)$$

В конечном итоге алгоритм построения некоторого звена траектории частицы имеет следующий вид:

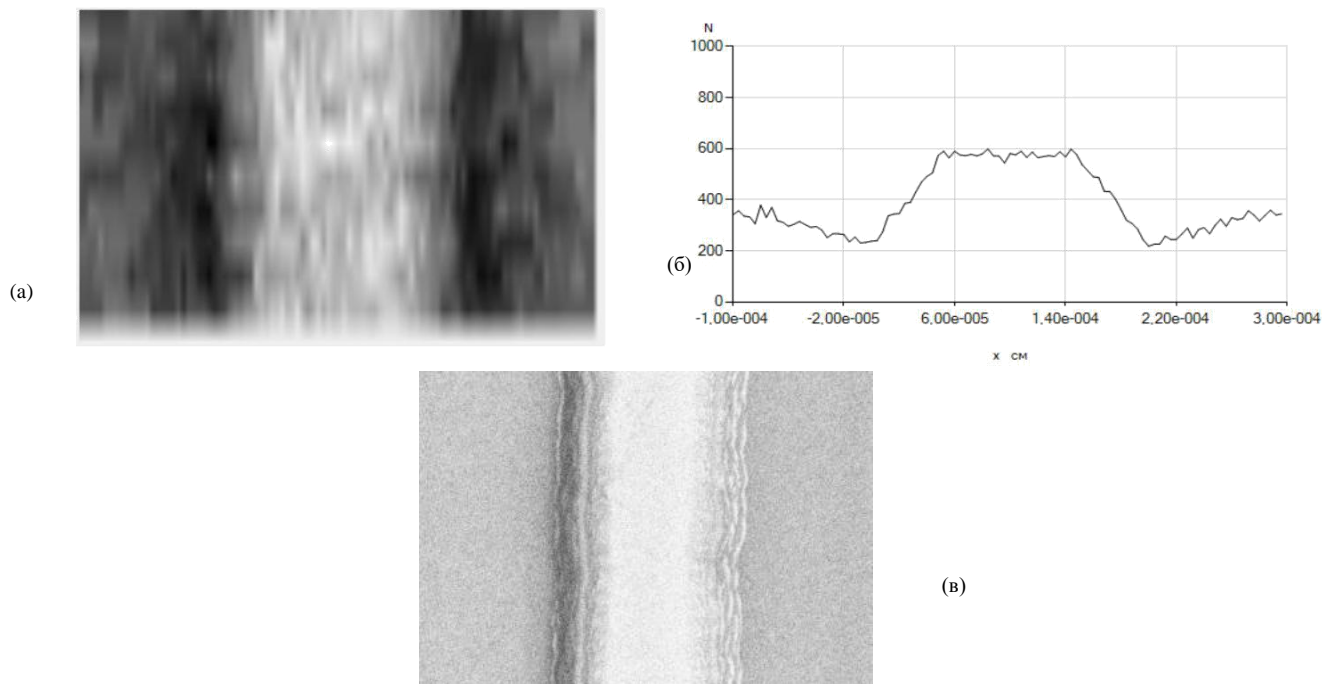
- проверка достижения критической энергии, при которой электрон перестает двигаться в веществе;
- определение направления движения рассеянной частицы в исходной системе координат;
- розыгрыш пробега частицы по формуле (1);
- вычисление координат точки взаимодействия;
- розыгрыш потери энергии по формуле (4);
- проверка вылета частицы из объекта и ее регистрации в детекторе;

Применение этого метода для заряженных частиц связано с огромными вычислительными затратами, поскольку взаимодействие заряженных частиц обычно сопровождается очень большим числом соударений. При использовании большого количества траекторий (до 10 000) и правильном выборе алгоритма расчетов методом Монте–Карло основные характеристики взаимодействия определяются с точностью до 1-5%.

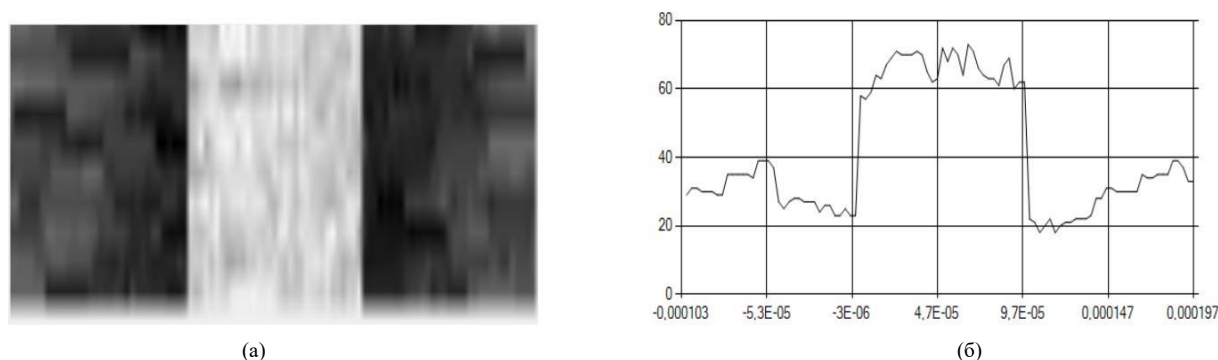
### 3. Экспериментальные результаты

В растровом электронном микроскопе построение изображения происходит за счет отраженных электронов, которые попадают в детекторы. От количества электронов зависит распределение интенсивности, которое и представляет собой изображение. Сканирование ведется по плоскости образца пучком электронов относительно небольшого размера.

В результате работы была разработана программа для моделирования изображений микрорельефа получаемых в РЭМ методом Монте-Карло. В качестве примера микрорельефа были рассмотрены трапецевидная и П-образная ступени кремния. Также рассмотрим по одному сечению для каждой из них. На рис. 1 представлено изображение и кривая видеосигнала от этого изображения. Смоделированные изображения для П-образной ступени представлены на рис. 2.



**Рис. 1.** Смоделированное изображение трапецивидной формы вступени, формируемого в режиме детектирования вторичных электронов (а) и кривая видеосигнала от этого изображения (б), изображение трапецивидной ступени полученное с помощью РЭМ.



**Рис. 2.** Смоделированное изображение П-образной формы вступени, формируемого в режиме детектирования вторичных электронов (а) и кривая видеосигнала от этого изображения (б).

#### 4. Результаты и их анализ

Разработанная программа моделирования изображений показала достаточно точную сходимость результатов и реальных изображений получаемых в РЭМ. Данная программа позволяет достаточно точно сопоставить значения высоты, наклона деталей микрорельефа и параметров работы моделируемого микроскопа, что в конечном итоге может помочь произвести 3D реконструирование микрорельефа, используя контрастно/яркостные картины реальных изображений получаемых в РЭМ.

#### 5. Заключение

В работе был реализован метод Монте-Карло для формирования изображений микрорельефа. Также были получены и проанализированы изображения микрорельефа двух типов. Была разработана программа, позволяющая получать изображения микрорельефа, а также проводить анализ образца в различных сечениях.

Программа позволяет менять конфигурацию системы, что позволяет определить результаты для различных конструкций. Это позволяет экономить время при многостороннем анализе образца, когда необходимо получить результаты, например при различных положениях детекторов или особенностях формирования пучка. Помимо изображений в программе можно получить дополнительную информацию об образце, например, увидеть ход лучей в образце, распределение изодоз. Это позволяет получить больше данных о свойствах образца и лучше его изучить. Таким образом, метод Монте-Карло можно применять, как и для получения изображений образца, так и для его дополнительного анализа. В данной работе основной задачей являлось получение изображений микрорельефа, что и было выполнено.

## Благодарности

Эта работа была частично поддержана Министерством образования и науки Российской Федерации в структуре внедрения Программы увеличения конкурентоспособности СГАУ среди ведущих в мире научных и образовательных центров в течение 2013-2020г.; российским Фондом для грантов Фундаментального исследования (№ 14-07-97040, № 15-29-03823, № 15-29-07077, № 16-57-48006); программа ОНИТ РАН № 6 “Биоинформатика, современные информационные технологии и математические методы в медицине” 2016.

## Литература

- [1] Гоулдстейн, Дж. Практическая электронная растровая микроскопия / Дж. Гоулдстейн, Х. Яковица.- М: «Мир», 1978.- 656 с.
- [2] Рау, Э.И. Механизмы зарядки диэлектриков при их облучении электронными пучками средних энергий / Э.И. Рау, Е.Н. Евстафьева, М.В. Андрианов // Физика твердого тела. – 2008.– Т. 50, вып. 4.– С. 599-607.
- [3] Горшков, А.В. Улучшенный метод Монте-Карло для моделирования распространения зондирующего излучения в задачах оптической диффузионной спектроскопии / А.В. Горшков, М.Ю. Кириллин, В.П. Гергель // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. – 2014. – Т. 1, № 1. – С. 239-247.
- [4] Гуськов, С.С. Статистическое моделирование роста кристалла с учётом его атомной структуры / С.С. Гуськов, М.А. Фаддеев, Е.В. Чупрунов // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 1, №6. – С. 45-50.
- [5] Скаков, П.С. Исследование биологических объектов в оптической когерентной томографии с обработкой данных последовательным методом Монте-Карло / П.С. Скаков, М.А. Волынский, И.П. Гуров, П.А. Ермолаев // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2014. – Т. 92, №4. – С. 23-28.